Búsqueda de raíces mediante el cálculo de valores propios de *matrices de colega*

Teoría del Análisis numérico

Andrés Hernández Vargas
Francisco Javier Díaz Perdomo
Joaquín Peñuela Parra

Departamento de Matemáticas
Universidad de los Andes

June 4, 2022

Introducción

Six Myths of Polynomial Interpolation and Quadrature

Lloyd N. Trefethen FRS, FIMA, Oxford University

Mito 6.¿Por qué esto es importante?

Para este proyecto estudiaremos el mito seis del artículo [5], el cual se centra en el hecho de que encontrar las raíces de ciertos polinomios como *funciones de sus coeficientes* es un problema mal condicionado; sin embargo, poco es lo que se habla con respecto a encontrarlas como *funciones de sus valores*. En particular, en nuestro proyecto abordaremos el siguiente teorema con el objetivo de comparar con diferentes métodos numéricos para calcular raíces polinomiales.

¿Por qué calcular ceros es importante?

Conocer los ceros de una función tiene muchas aplicaciones, desde poder optimizar sistemas en economía hasta analizar cuando un material podría sufrir una transición de fase.

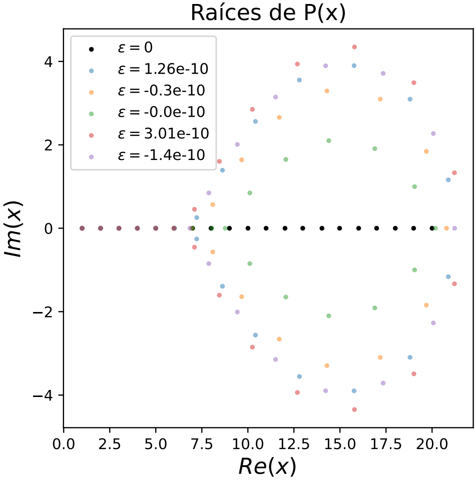
La mayoría métodos que existen tienen en común que se desarrollan en la *base de monomios* del espacio de polinomios. Es decir, que todo polinomio se piensa como una combinación lineal del conjunto: $\{x^k\}_{k=0}$. Sin embargo, trabajar en esta base de polinomios genera problemas en el condicionamiento del cálculo de raíces de polinomios, para ver esto consideremos el siguiente polinomio:

$$P_{\text{Wilkinson}}(x) = \prod_{i=1}^{20}(x - i)$$

Por esto, es claro que las raíces del polinomio serán $x = 1, ..., 20$. Sin embargo, **¿Qué sucede si perturbamos el polinomio?**

Perturbaciones pequeñas en el polinomio de Wilkinson

$$P(x) = P_{\text{Wilkinson}}(x) + \varepsilon x^{14}$$



Polinomios de Chebyshev

Los polinomios de Chebyshev son un conjunto de polinomios ortogonales que se pueden encontrar a través de la siguiente relación de recurrencia:

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

Con $T_0(x) = 1$ y $T_1(x) = x$.

De hecho, el conjunto $\{T_0(x), T_1(x), T_2(x), ...\}$ es una base ortogonal del espacio de polinomios, por lo que cualquier polinomio $P(x)$ se puede escribir como una combinación lineal de ellos. En adición a esto, cualquier función $f(x)$ se puede interpolar para obtener una expresión del estilo $f(x) = \sum_k a_k T_k(x)$.

Matriz de cambio de base

Sea $f(x)$ definida sobre $x \in [a, b]$:

$$f_n(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k T_k(y) = \sum_{k=0}^{n} b_k y^k, \qquad y(x) \in [-1, 1]$$

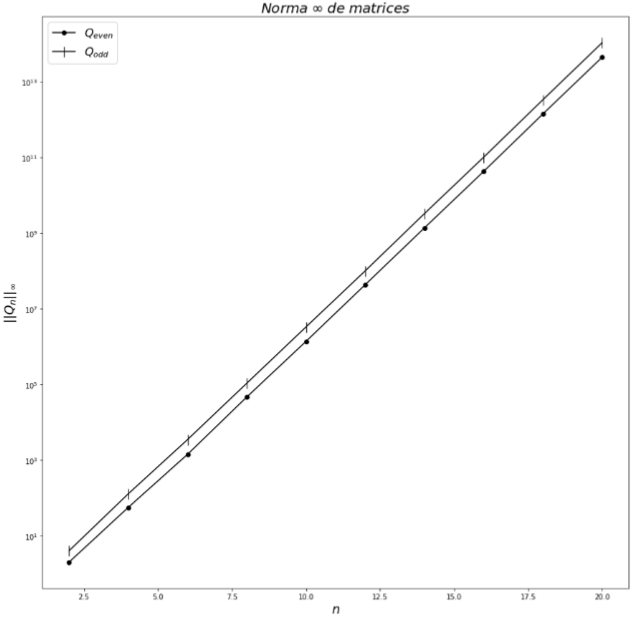
Al realizar un reescalamiento de la forma $y \equiv \frac{2x-(b+a)}{b-a}$ es posible disminuir a la mitad el costo de transformar de $\{a_j\}$ a $\{b_j\}$.

$$b_{even} = Q^{even} a_{even} \qquad\qquad b_{odd} = Q^{odd} a_{odd}$$

$$Q_{11}^{even} = 1, \quad Q_{jj}^{even} = 2^{2j-3}, \quad Q_{11}^{odd} = 2^{2j-3}$$

$$Q_{j-k,j}^{even} = \left[-\frac{(2j-2k)(2j-2k-1)}{2k(4j-2k-4)} Q_{j-k+1,j}^{even} \right]$$

$$Q_{j-k,j}^{odd} = \left[-\frac{(2j-2k+1)(j-k)}{k(4j-2k-2)} Q_{j-k+1,j}^{odd} \right]$$



Norma ∞ de matrices
Q_{even}
Q_{odd}
$\|Q_n\|_\infty$
n

¿Por qué es útil utilizar la base de Chebyshev?

Consideremos el siguiente reescalamiento en el polinomio de Wilkinson:

$$W(x;N) = \prod_{j=1}^{N} \left(x - \frac{2j-N-1}{N-1} \right)$$

Escribamoslo en la base monomial y en la base de Chebyshev:

$$\begin{aligned} W(x;N) &= 0.11 \times 10^{-7} - 0.5 \times 10^{-5} x^2 + 0.33 \times 10^{-3} x^4 - 0.80 \times 10^{-2} x^6 \\ &+ 0.092 x^8 - 0.58 x^{10} + 2.09 x^{12} - 4.48 x^{14} + 5.57 x^{16} - 3.68 x^{18} \\ &+ x^{20} \\ W(x;N) &= \frac{1}{0.000049}[-1 - 0.18\, T_2(x) - 0.12\, T_4(x) - 0.036\, T_6(x) \\ &+ 0.045\, T_8(x) + 0.10\, T_{10}(x) + 0.12\, T_{12}(x) + 0.093\, T_{14}(x) \\ &+ 0.054\, T_{16}(x) + 0.021\, T_{18}(x) + 0.0039\, T_{20}(x))] \end{aligned}$$

Teorema (Matrices Colega)

Sea $p(x)$ un polinomio tal que:

$$p(x) = \sum_{k=0}^{n} a_k T_k(x), \quad a_n \neq 0$$

Entonces sus raíces son los valores propios de la matriz:

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & & \\ & \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & \frac{1}{2} \\ & & & & \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2a_n} \begin{pmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ a_0 & a_1 & a_2 & \dots & a_{n-1} \end{pmatrix}$$

Donde las entradas vacías son cero. En el caso en que hayan raíces iguales, estas corresponderán a valores propios que tengan la misma multiplicidad que la cantidad de raíces. [4].

¿Cómo calcular valores propios?

Iteración QR:

1. Calcular la factorización QR de A, denotemos $A_k = A$ y su factorización QR como $A_k = Q_k R_k$.
2. Definir $A_{k+1} = R_k Q_k$.
3. Repetir los pasos anteriores con A_{k+1} como punto de partida.

En este punto el lector podría realizarse la siguiente pregunta: ¿Qué tiene que ver esto con el cálculo de valores propios? Para responder esto es necesario recordar la descomposición real de Schur (una generalización de la descomposición de Schur), esta descomposición está dada por el siguiente teorema:

Teorema de la descomposición real de Schur

Sea $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ entonces existe una matriz ortogonal Q tal que:

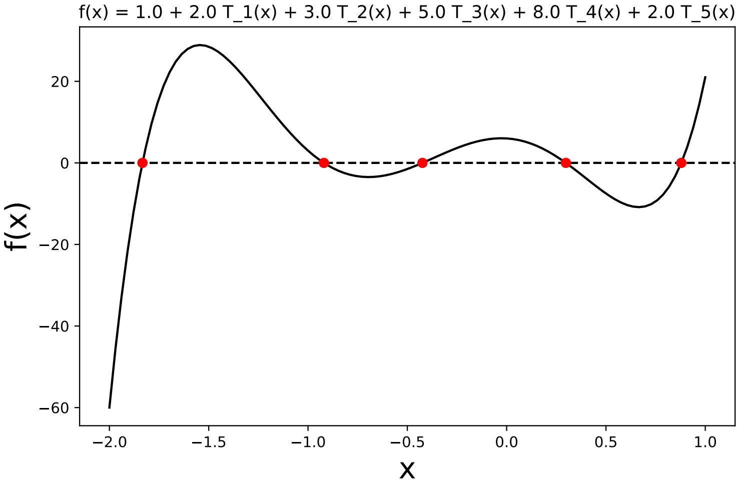
$$Q^T A Q = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & \cdots & R_{1m} \\ & R_{22} & \cdots & R_{2m} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & R_{mm} \end{bmatrix} = T$$

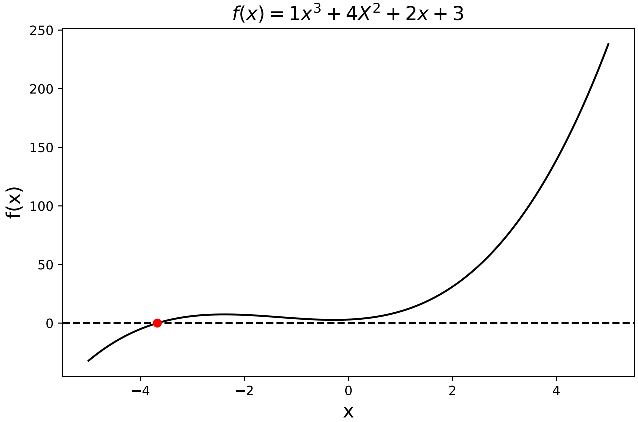
Es una matriz cuasi-triangular superior semejante a A (los valores propios de A y R son los mismos) donde la diagonal está formada por bloques de matrices 2×2 relacionados a los valores propios complejos de A y bloques de matrices 1×1 que corresponden a los valores propios reales de A.

¿Qué tiene que ver esta descomposición con la iteración QR?

$$A_k \to T \text{ para } k \text{ lo suficientemente grande.}$$

Simulaciones





¿Qué sucede con las otras dos raíces complejas?

Pueden calcular analizando los bloques 2×2 de la matriz resultante de aplicar la iteración QR a la matriz Colega. Al hacerlo se encontrarón: $x = -0.16100326 + 0.88867321j$ y $x = -0.16100326 - 0.88867321j$.

$\rightarrow$ Otra forma de apreciarlas es en las elipses de Bernstein.

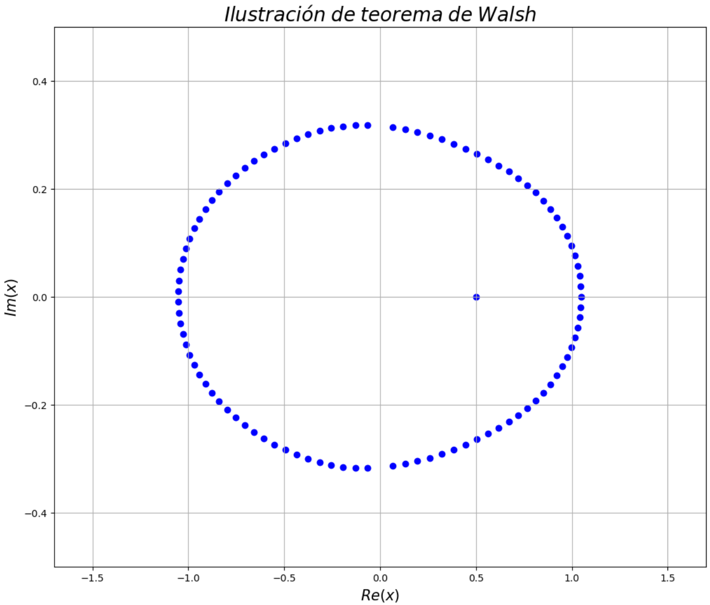


Ilustración de teorema de Walsh
0.4
0.2
0.0
−0.2
−0.4
Im(x)
−1.5
−1.0
−0.5
0.0
0.5
1.0
1.5
Re(x)

Condicionamiento del método con las matrices colega

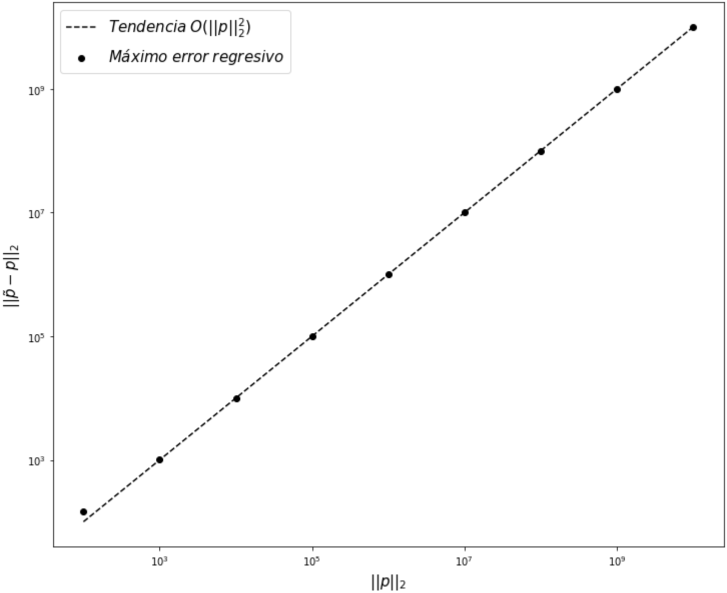
Analíticamente, dado un polinomio escalar mónico en la base de Chebyshev $p(x)$, es posible demostrar que si las raíces de $p(x)$ se calculan como los valores propios de una matriz colega utilizando un algoritmo de valores propios estable regresivamente, como el algoritmo QR, entonces las raíces calculadas son las raíces exactas de un polinomio mónico en la base de Chebyshev $\tilde{p}(x)$ tal que:

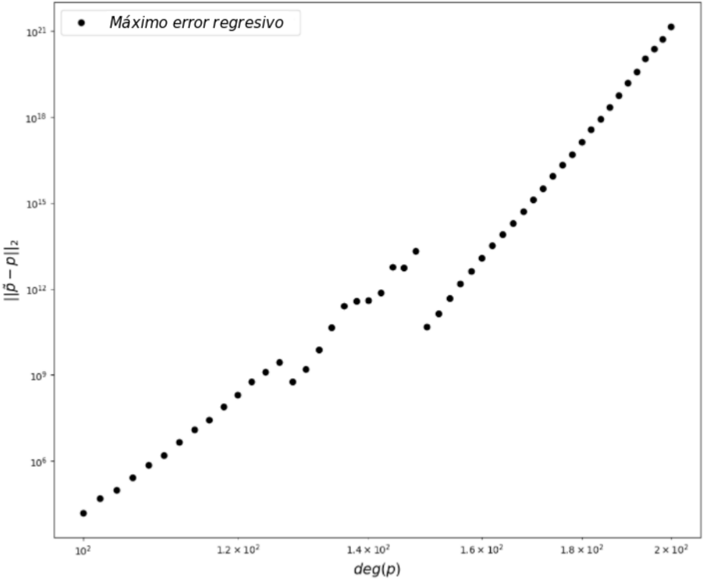
$$\frac{||\tilde{p} - p||_2}{||p||_2} = O(u)||p||_2$$

Más aún, es posible llegar a una cota superior de la forma:

$$||\tilde{p} - p||_2 \leq 8n^2(n^2 + n)^{1/2} O(u)||p||_2^2$$

Simulaciones




Máximo error regresivo
10^{21}
10^{18}
10^{15}
10^{12}
10^{9}
10^{6}
$||\tilde{p} - p||_2$
10^2
1.2×10^2
1.4×10^2
1.6×10^2
1.8×10^2
2×10^2
$deg(p)$

Referencias bibliográficas

Burden, R. L., & Faires, J. D. (2010). Numerical analysis. Cengage learning.

Good, I. J. (1961). The colleague matrix, a Chebyshev analogue of the companion matrix. The Quarterly Journal of Mathematics, 12(1), 61-68.

Noferini, V., & Pérez, J. (2017). Chebyshev rootfinding via computing eigenvalues of colleague matrices: when is it stable?. Mathematics of Computation, 86(306), 1741-1767.

Trefethen, L. N. (2019). Approximation Theory and Approximation Practice, Extended Edition. Society for Industrial and Applied Mathematics.

Trefethen, L. N. (2011). Six myths of polynomial interpolation and quadrature. Mathematics Today, 47(4), 184-188.

Arbenz, P (2018). Numerical Methods for Solving Large Scale Eigenvalue Problems Lecture Notes.

- Arbenz, P (2018). Numerical Methods for Solving Large Scale Eigenvalue Problems Lecture Notes.
- J. L. Walsh, The analogue for maximally convergent polynomials of Jentzsch's theorem, Duke Math. J. 26 (1959), 605–616.